



TITLE:

モノドロミーを用いた非断熱遷移
の解析的計算(3)分子科学、核理論
における量子カオスと半古典理論
,京大基研短期研究会 量子力学とカ
オス-基礎的問題からナノサイエ
ンスまで-,研究会報告)

AUTHOR(S):

加藤, 岳生

CITATION:

加藤, 岳生. モノドロミーを用いた非断熱遷移の解析的計算(3)分子科学、核理論における
量子カオスと半古典理論,京大基研短期研究会 量子力学とカオス-基礎的問題からナノサ
イエンスまで-,研究会報告). 物性研究 2004, 82(5): 719-720

ISSUE DATE:

2004-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/97866>

RIGHT:

モノドロミーを用いた非断熱遷移の解析的計算

大阪市立大学 工学研究科 加藤 岳生,¹

量子系の非断熱遷移は多くの分野で現れる基本的な問題であり、レーザー物理、原子衝突や量子光学などの系で活発な研究が行われてきた。また量子ビットの制御、分子磁性体の磁化過程やボーズ凝縮系などの分野で非断熱遷移が再び注目を集めるようになってきている。非断熱遷移の解析的研究は古くから試みられており [1, 2, 3, 4]、パラメータ依存性に関して広い知見を提供している。本講演ではこれらの解析的な研究のうち超幾何関数の微分方程式に帰着される場合に注目し、新しい可解クラスについて議論する。

時間依存する二準位系のハミルトニアンを

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon(t) & V(t) \\ V(t) & -\varepsilon(t) \end{pmatrix}$$

のように表す。ここで $\varepsilon(t)$, $V(t)$ は時間に依存する関数である。 $t = -\infty$ で系が基底状態にあるとし、 $t = \infty$ で系が励起状態にある非断熱遷移確率 P を計算する。これまでの解析的研究 [3, 4] で、超幾何関数の微分方程式へ帰着させる場合は $z(t) = (1 + \tanh(t/T))/2$ の形で実変数変換を行っていた (T は定数)。しかしここでは複素数値をもつ $z(t) = 1/2 + \sinh(t/T)/2i$ への変数変換を採用し、これによって超幾何関数へ帰着される場合を考える [5]。このように変数をとった時は、時間発展は図 1 (a) のような複素数経路 C で表される。この複素平面上で超幾何関数の特異点は $z = 0, 1, \infty$ の 3 点であることに注意する。この経路 C は図 1 (b) のような二つの経路 C_1 , C_2 の二つに分けることができる。ここで経路 C_1 にそっての解の解析接続が問題となるが、この解析接続

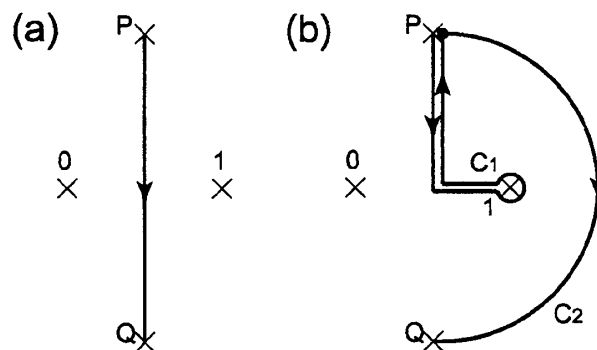


図 1: 変数 $z(t)$ の複素平面上の経路; (a) もとの経路 (b) 変形した経路.

¹ E-mail: kato@a-phys.eng.osaka-cu.ac.jp

は微分方程式の大域的な性質であるモノドロミー行列によって表すことができる。すなわちこの計算では非断熱遷移が直接モノドロミー行列と関連することになる。

以上の方針に従って外場が $\varepsilon(t) = E_0 \operatorname{sech}(t/T) + E_1 \tanh(t/T)$, $V(t) = V_0$ (E_0, E_1, V_0 は定数) で与えられる場合について、断熱遷移を計算すると [6]

$$P = \frac{\sinh^2(\pi T E_1) \cos^2(\pi T E_0)}{\sinh^2\left(\pi T \sqrt{E_1^2 + V_0^2}\right)} + \frac{\cosh^2(\pi T E_1) \sin^2(\pi T E_0)}{\cosh^2\left(\pi T \sqrt{E_1^2 + V_0^2}\right)}$$

となる。この結果は、すでに得られている結果の一部を正しく再現し [3, 4], 極限をとることによって Landau-Zener 公式も導くことができる。またこれらの結果をさらに一般化し、以下のような外場に対しても、同じ遷移確率を与えることを示すことができる。

$$\varepsilon(t) = \frac{E_0 T + E_1 T y}{1 + y^2} \frac{dy}{dt}, \quad V(t) = \frac{V_0 T}{\sqrt{1 + y^2}} \frac{dy}{dt}$$

ここで $y(t)$ は t に関して単調増加する任意の関数である。さらには以上の議論を多準位系へ拡張することも可能である。

ここではモノドロミーを利用した非断熱遷移確率の計算について議論を行ったがこの手法の拡張やストークス現象との関わりについてが将来の課題である。この講演は、中村勝弘氏 (大阪市立大学) と M. Lakshmanan 氏 (Bharathidasan 大学) との共同研究に基づいている。

参考文献

- [1] H. Nakamura, *Nonadiabatic Transition: Concepts, Basic Theories and Applications* (Cambridge, Cambridge University Press, 2002).
- [2] L. D. Landau, Phys. Z. Sov. **2** (1932) 46; C. Zener, Proc. R. Soc. A 137 696.
- [3] N. Rosen and C. Zener, Phys. Rev. **40** (1932) 502.
- [4] Yu. N. Demkov and M. Kunike, Vestn. Leningr. Univ. Fiz. Khim. **16** (1969) 39; K.-A. Suominen and B. M. Garraway, Phys. Rev. A **45** (1992) 374.
- [5] この変数変換は以下の文献でも見られるが非断熱遷移確率の計算は行っていない; A. M. Ishkkyanhan, Opt. Commun. **176** (2000) 155.
- [6] 詳しくは以下の文献を参照のこと; T. Kato, K. Nakamura and M. Lakshmanan, J. Phys. A **36** (2003) 5803.